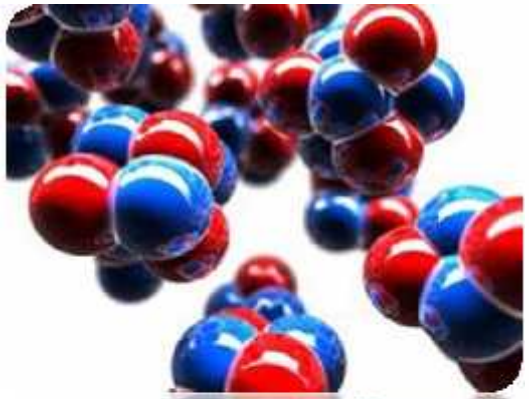
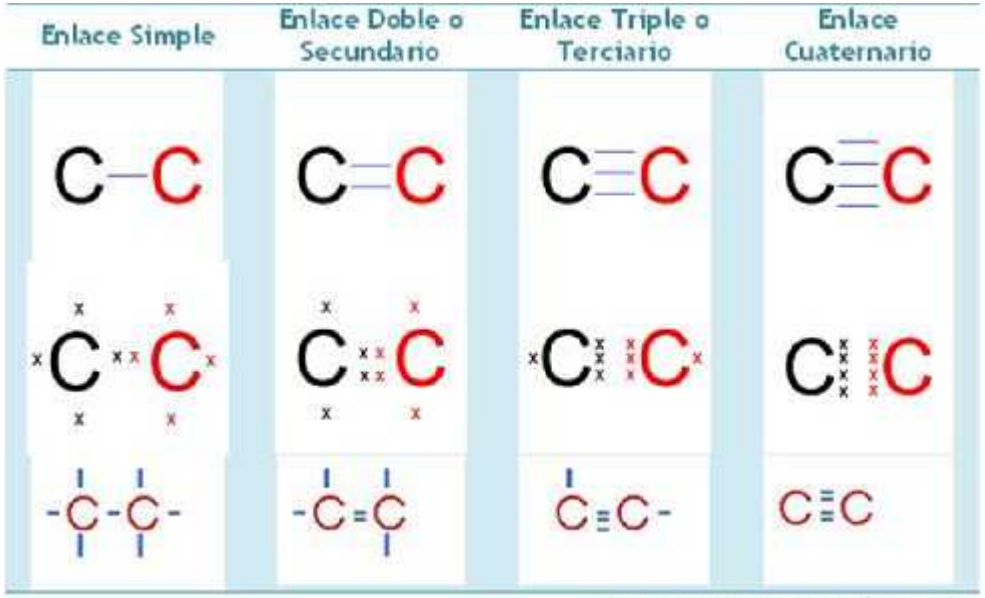
El enlace químico en los compuestos orgánicos



enlacesquimicos.blogspot.com



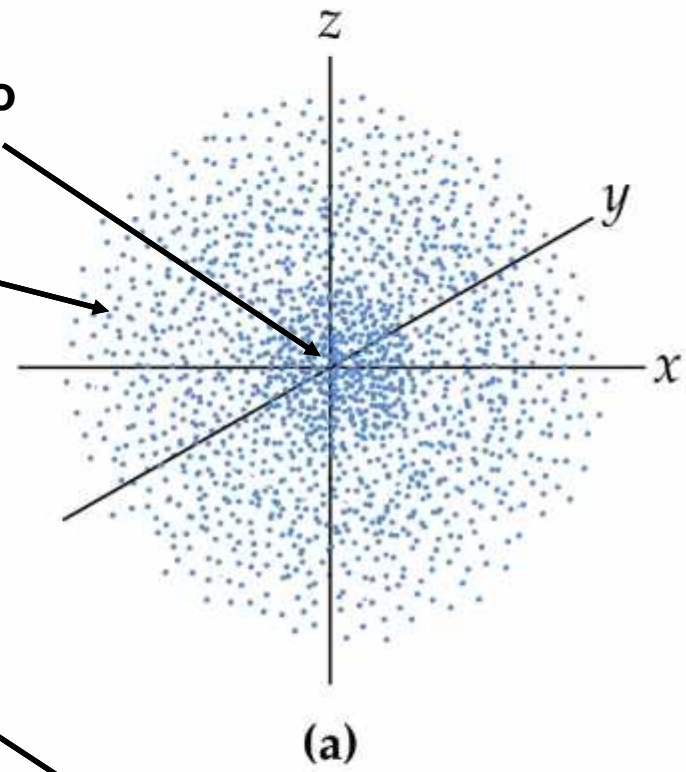
laquimicadefracio.wikispaces.com

Estructura de los átomos

MODELO MECANOCUÁNTICO DE ÁTOMO

Cubierta electrónica

Núcleo



ORBITALES

Carácter ondulatorio de los electrones

Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Caracterizados por números cuánticos:

n : número cuántico principal

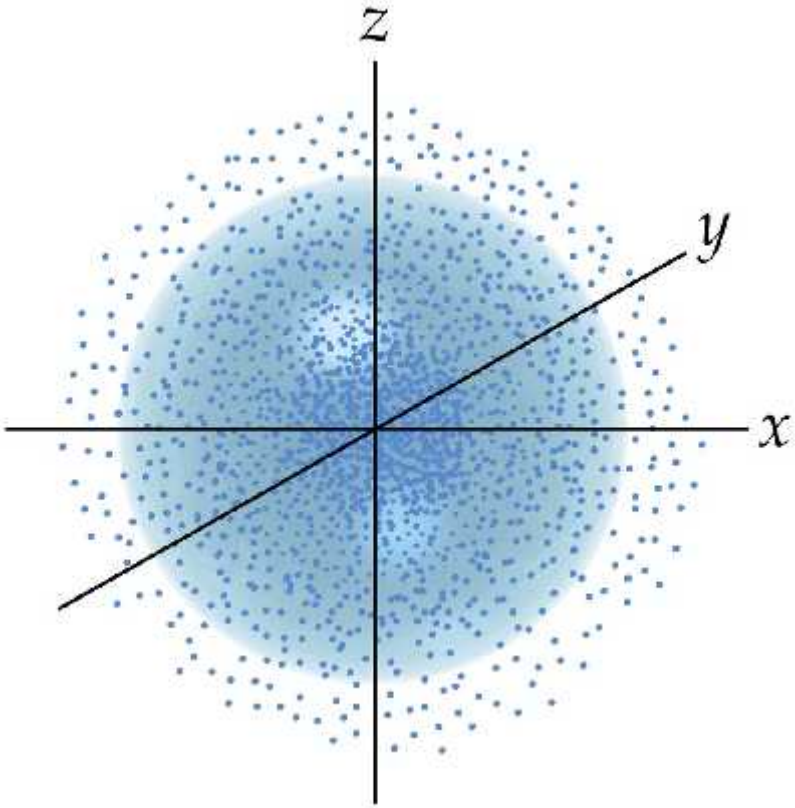
l : número cuántico secundario

m: número cuántico magnético

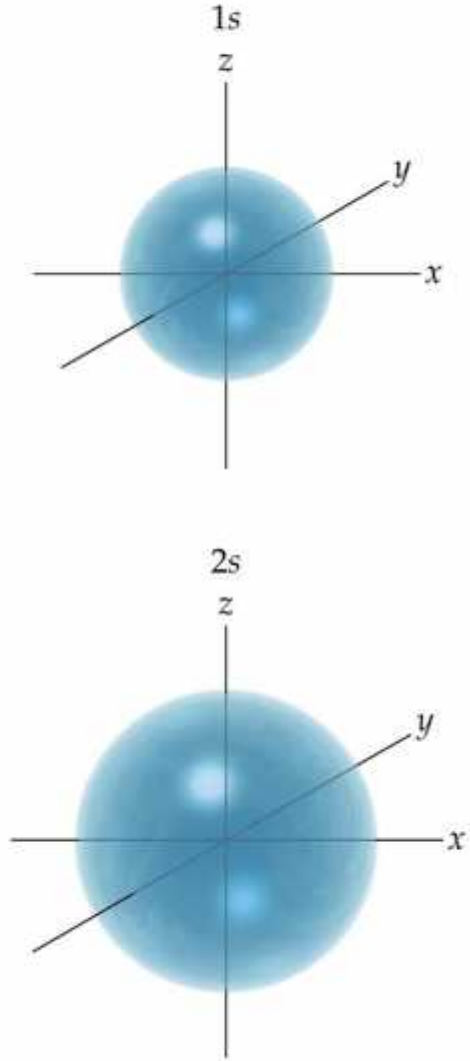
NIVELES Y SUBNIVELES EN LA CUBIERTA ELECTRÓNICA

NIVEL	nº de subniveles	Letra que especifica el subnivel			
$n = 4$	4	s	p	d	f
$n = 3$	3	s	p	d	
$n = 2$	2	s	p		
$n = 1$	1	s			

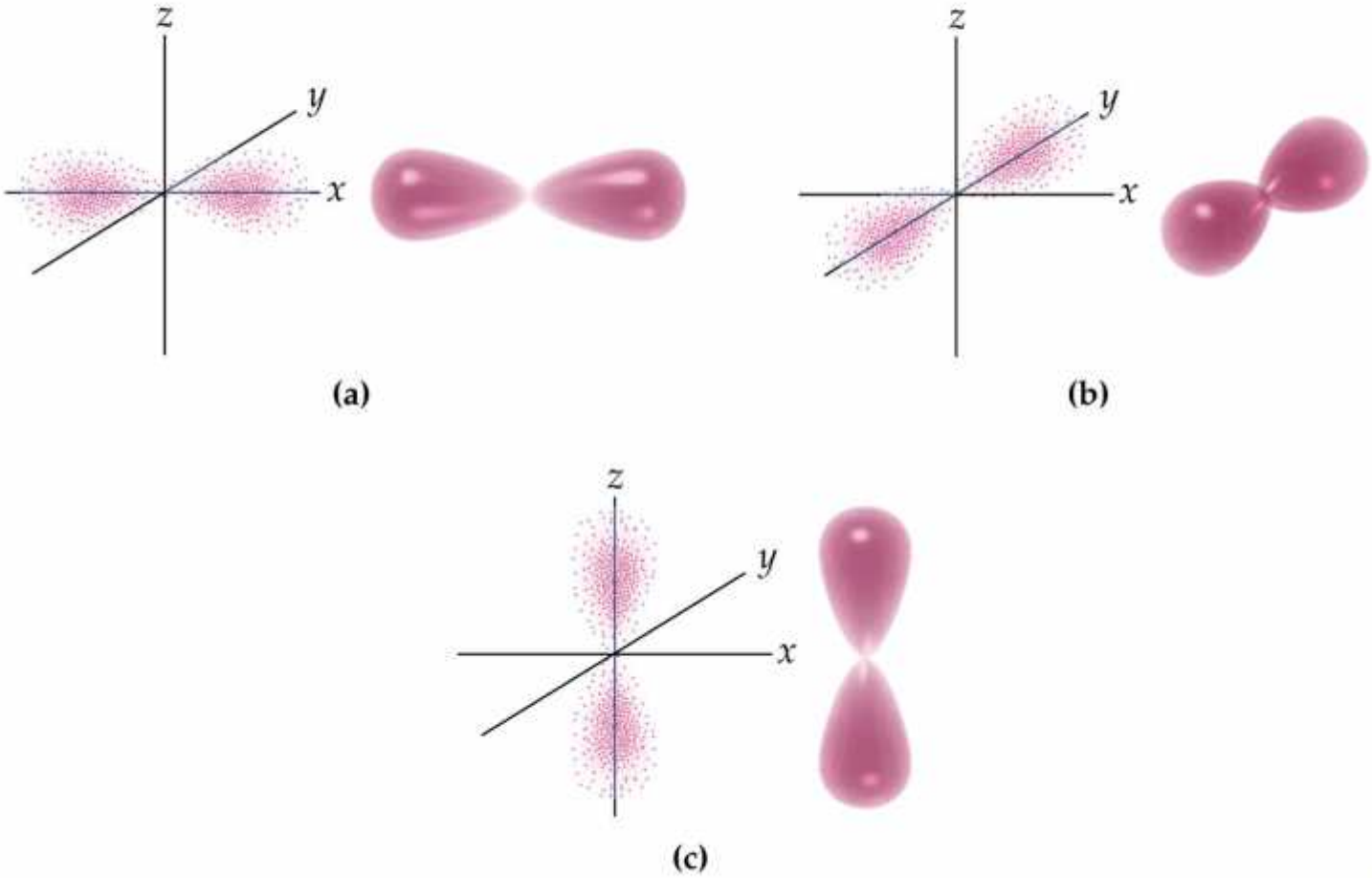
ORBITAL s



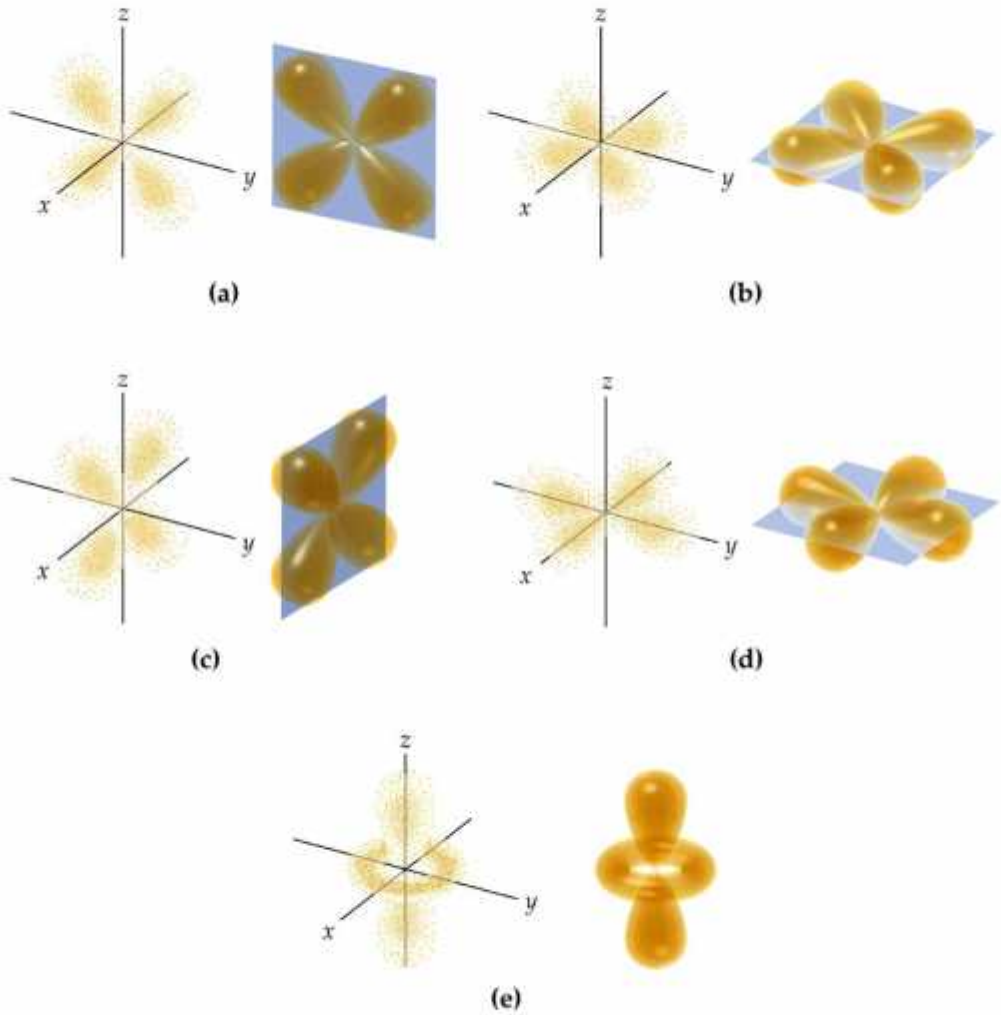
ORBITALES 1s y 2s



ORBITALES 2p



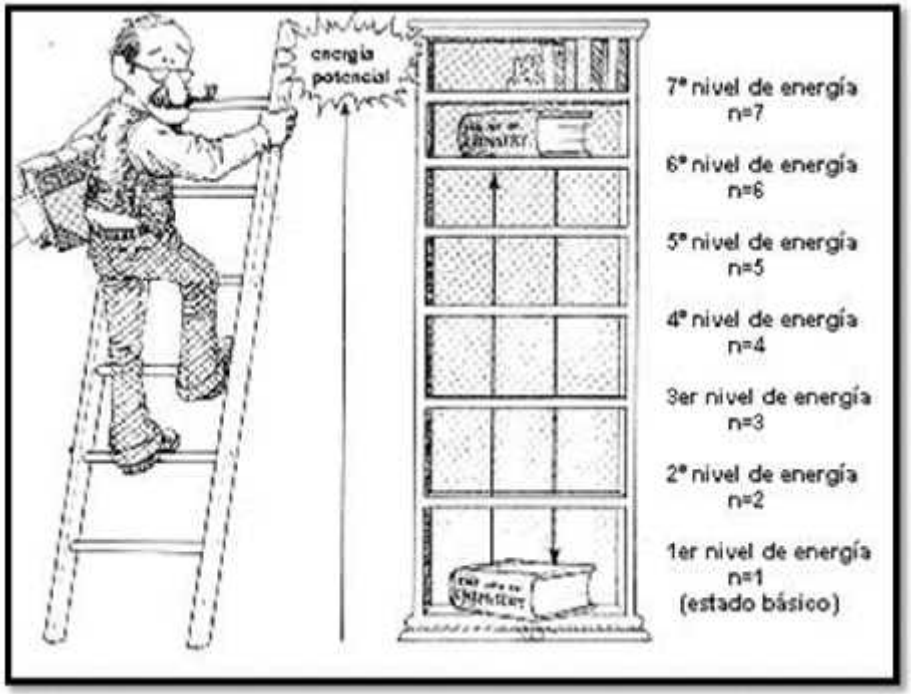
ORBITALES 3 d



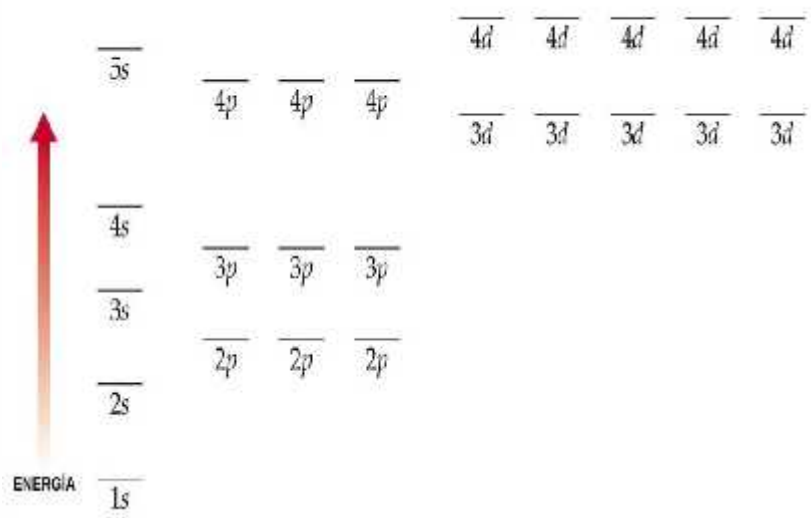
ENERGÍA DE LOS ORBITALES

Regla cuántica de (n+ℓ):

Entre dos orbitales tendrá menor energía aquél en el que la suma de los números cuánticos n y l sea menor. Si el resultado fuese el mismo para ambos, tendrá menor energía aquél de menor número cuántico principal n



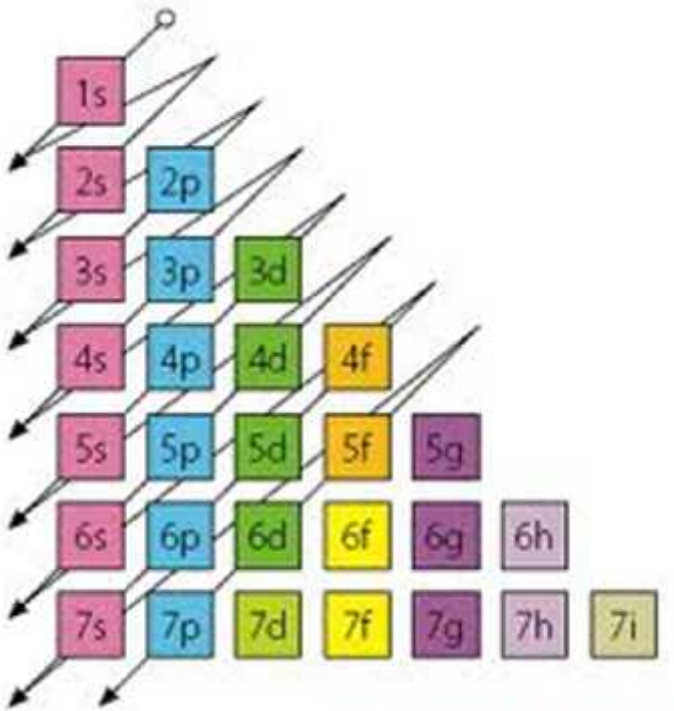
quimica-unidad-i-teoria-cuantica.blogspot.com



¿EN QUÉ ORDEN SE LLENAN LOS ORBITALES?

Principio de construcción (Aufbau)

En su estado fundamental la distribución electrónica de un elemento se construye a partir del inmediato anterior, adicionándole un electrón de modo que le confiera la máxima estabilidad (menor energía)



fyqcastilodelima.wordpress.com

¿CUÁNTOS ELECTRONES CABEN EN UN ORBITAL?

Principio de exclusión de Pauli (1925)

En un determinado sistema cuántico (átomo o molécula) no pueden existir dos electrones con los cuatro números cuánticos idénticos

Por tanto, en <u>un orbital sólo caben dos electrones</u> que compartirían tres números cuánticos y se diferenciarían en el número cuántico de spin (s)

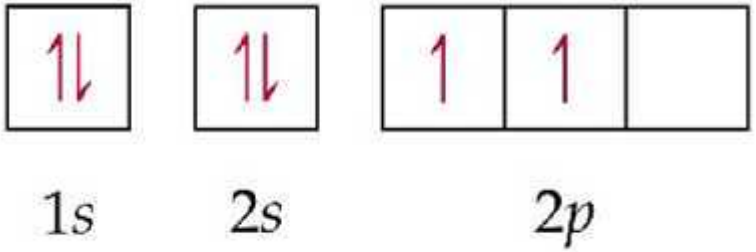
H		↑	
		1s	
He	$1s^2$	↑↓	
Li	$1s^2 2s^1$	↑↓	↑
		1s	2s

¿CÓMO SE LLENAN LOS GRUPOS DE ORBITALES DE IGUAL ENERGÍA?

Regla de la máxima multiplicidad de Hund

Cuando una serie de orbitales de igual energía (p, d , f) se están llenando con electrones, éstos permanecerán desapareados mientras sea posible, manteniendo los espines paralelos

C $1s^2 2s^2 2p^2$



quimica-unidad-i-teoria-cuantica.blogspot.com

Símbolo (nº e)	Configuración electrónica	Diagrama de orbitales
Li (3)	$1s^2 2s^1$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑
Be (4)	$1s^2 2s^2$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑↓
B (5)	$1s^2 2s^2 2p^1$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑↓ ; 2p: ↑ | |
C (6)	$1s^2 2s^2 2p^2$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑↓ ; 2p: ↑ | ↑ |
N (7)	$1s^2 2s^2 2p^3$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑↓ ; 2p: ↑ | ↑ | ↑
O (8)	$1s^2 2s^2 2p^4$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑↓ ; 2p: ↑↓ | ↑ | ↑
F (9)	$1s^2 2s^2 2p^5$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑↓ ; 2p: ↑↓ | ↑↓ | ↑
Ne (10)	$1s^2 2s^2 2p^6$	1s: ↑↓ ; 2s: ↑↓ ; 2p: ↑↓ | ↑↓ | ↑↓

CAPA DE VALENCIA

blogdefisicayquimicadecuartoeso.c.over-blog.com

Si $1s^2 2s^2 2p^6 \; 3s^2 3p^2$

Core electrons — Valence electrons

Ge $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 \; 4s^2 \; 3d^{10} \; 4p^2$

28 core electrons — 4 valence electrons

CAPA DE VALENCIA DE LOS 18 PRIMEROS ELEMENTOS

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
1 **H** $1s^1$							2 **He** $1s^2$
3 **Li** $2s^1$	4 **Be** $2s^2$	5 **B** $2s^2 2p^1$	6 **C** $2s^2 2p^2$	7 **N** $2s^2 2p^3$	8 **O** $2s^2 2p^4$	9 **F** $2s^2 2p^5$	10 **Ne** $2s^2 2p^6$
11 **Na** $3s^1$	12 **Mg** $3s^2$	13 **Al** $3s^2 3p^1$	14 **Si** $3s^2 3p^2$	15 **P** $3s^2 3p^3$	16 **S** $3s^2 3p^4$	17 **Cl** $3s^2 3p^5$	18 **Ar** $3s^2 3p^6$

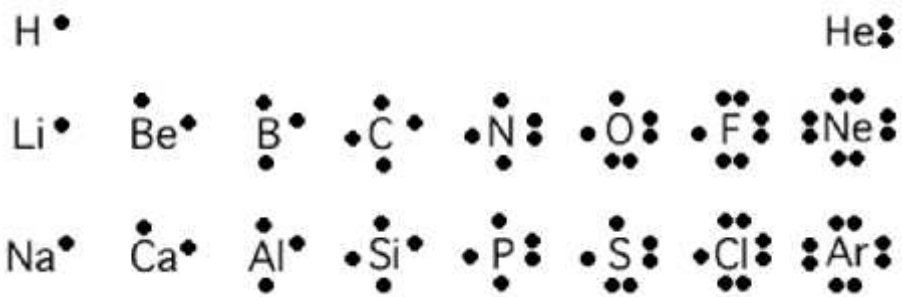
TEORÍAS QUE EXPLICAN LA FORMACIÓN DEL ENLACE COVALENTE Y LA GEOMETRÍA MOLECULAR

TEORÍA		GEOMETRÍA
OCTETO ELECTRÓNICO Lewis	Compartición de electrones	Método de repulsión de electrones de la capa de valencia
ENLACE-VALENCIA Heitler-London	Solapamiento de O.A.	Hibridación de O.A
ORBITAL MOLECULAR Mulliken-Hund	Formación de O.M.	Orbitales moleculares

https://www.youtube.com/watch?v=QoP3D65vq6A

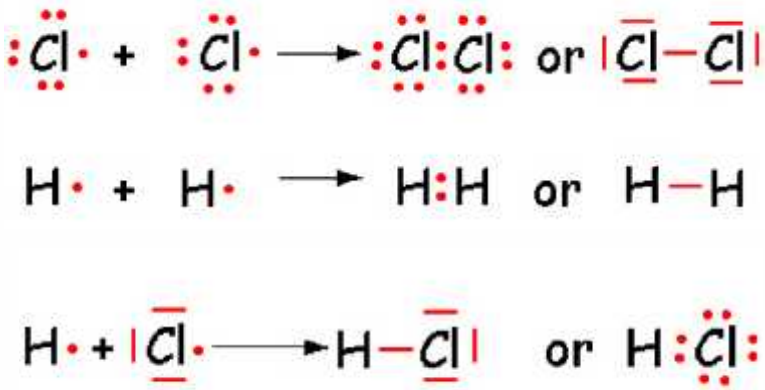
TEORÍA DE LEWIS

Átomos



Los átomos forman moléculas porque compartiendo electrones alcanzan el octeto electrónico

Moléculas diatómicas



Cada oxígeno tiene ocho electrones en su capa de valencia

Cada nitrógeno tiene un octeto de electrones s

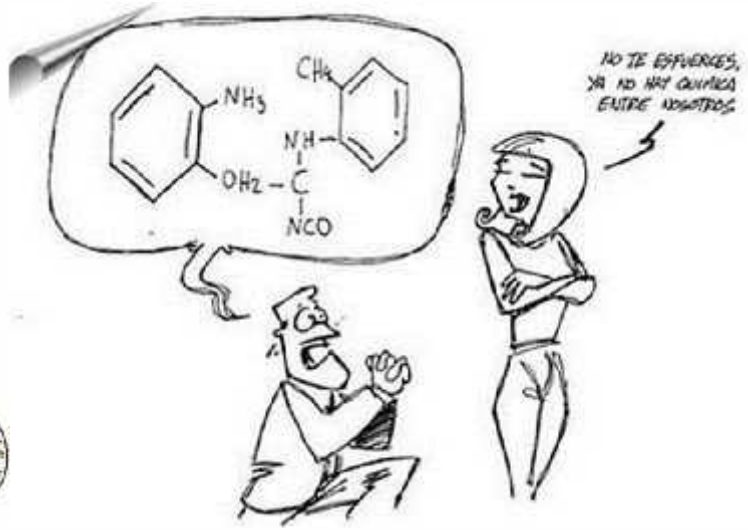
https://www.youtube.com/watch?v=e0dYVtyAhd8

Resumen de las reglas de Lewis

- Cuenta los electrones de valencia (no olvidar las cargas si se trata de un ion molecular).
- Número de pares de electrones: (electrones de valencia/2)
- Sitúa como átomo central el menos electronegativo. ¡Nunca el H!.
- Une los átomos con pares de electrones enlazantes (PE)
- Completa los octetos agregando pares de electrones solitarios (PS) a los átomos.
- Establece enlaces múltiples con los átomos que queden con su octeto incompleto.
- Asigna cargas formales: CF = Z - (#PE/2) - (#PS)
- Elige las estructuras con la menor separación de carga posible (recuerda que los átomos del 3er período en adelante admiten más de cuatro pares a su alrededor).
- Indica si hay estructuras equivalentes en resonancia.

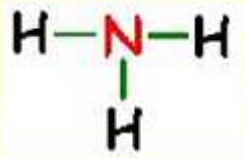
Ejemplo

1. Se elige el átomo central. Nunca H. Generalmente es el menos electronegativo.
2. Se cuentan los e^- de valencia.
3. Se forman enlaces entre el átomo central y los periféricos.
4. Los e^- restantes se sitúan como pares solitarios para completar los octetes.

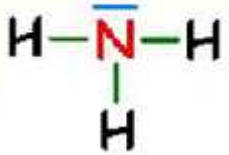


Amoníaco, NH_3

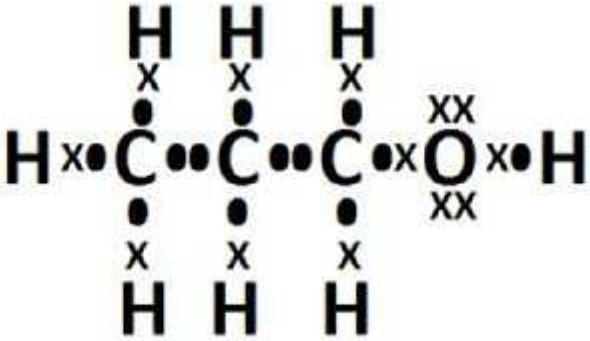
1. N es central
2. e^- de valencia = 5 + 3·1 = 8 (4 pares)
3.



4.



Molécula inorgánica



Molécula orgánica

En el establecimiento de las estructuras de Lewis es muy importante tener en cuenta tres aspectos

1.- Asignar cargas formales a los átomos

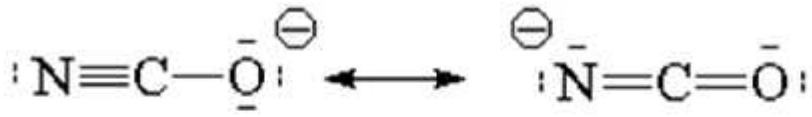
2.- Valorar la existencia de formas resonantes

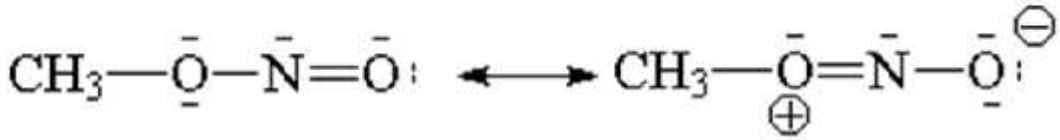
3.- Hay átomos que no cumplen la regla del octeto

Cargas formales

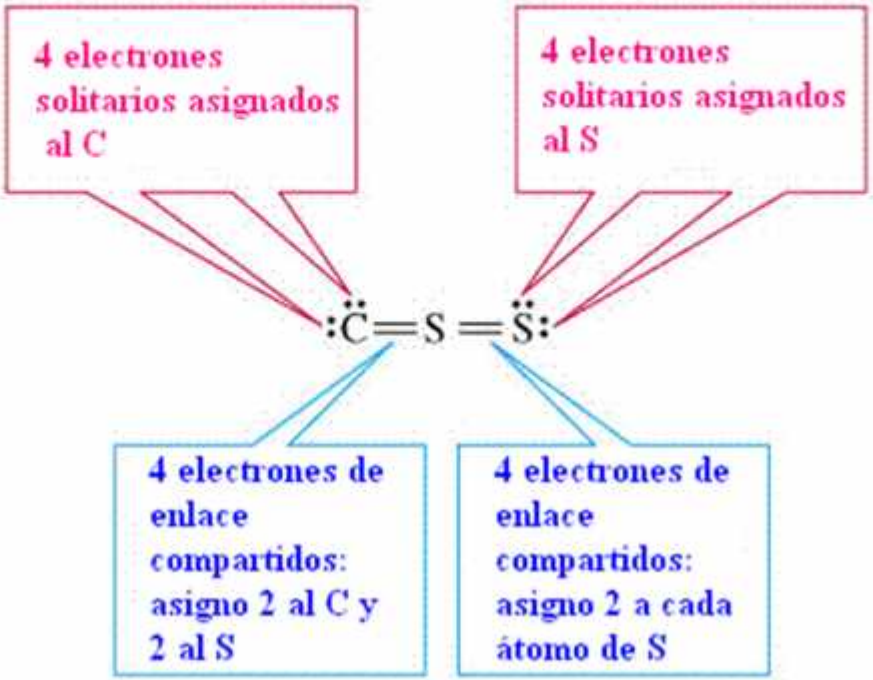
Para determinar cargas formales sobre los átomos:

Carga Formal = **Número e Capa valencia** - (**Número e desapareados** + **Mitad e compartidos**)





Ejemplo

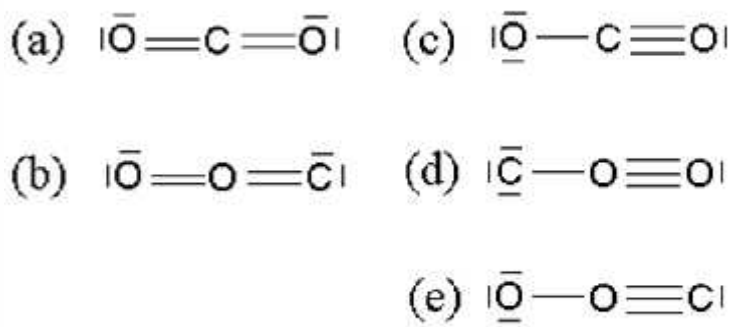


	C	S	S
Electrones valencia	4	6	6
Electrones asignados	6	4	6
Carga formal	−2	+2	0

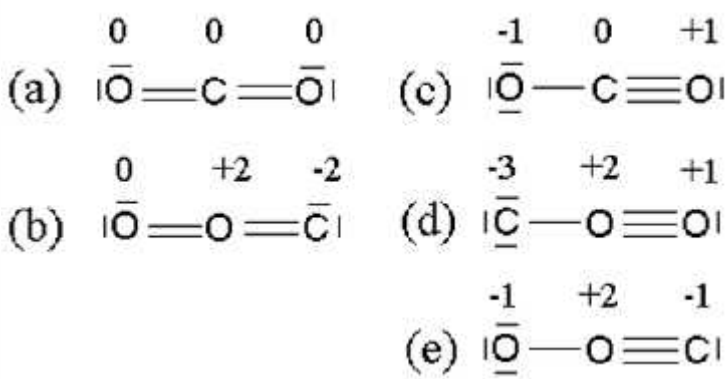
Carga Formal = Número e Capa valencia - (Número e Desapareados + Mitad e compartidos)

Ejercicio: Usar el concepto de carga formal para determinar la estructura de Lewis más estable para a) CO_2 b) N_2O

a) Diferentes estructuras de Lewis que satisfacen la regla del octeto

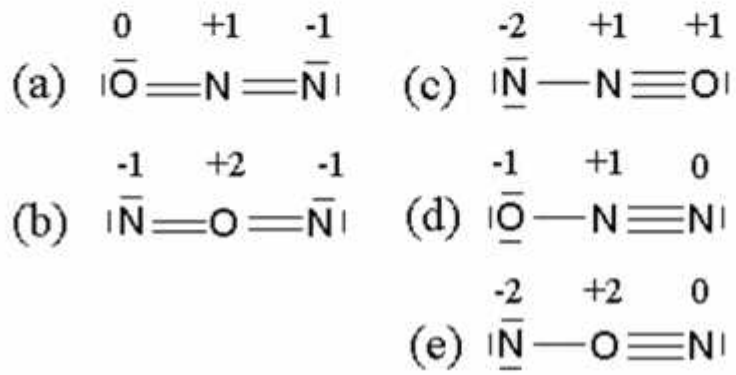


Para cada una de ellas se puede calcular la carga formal de cada átomo:



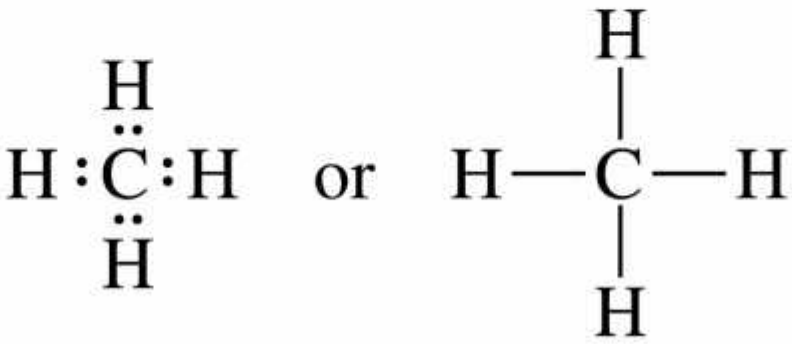
La carga formal se minimiza cuando el átomo de carbono se coloca en el centro y establece dobles enlaces con los átomos de oxígeno

b) Para el N_2O las posibles estructuras de Lewis con cargas formales son las siguientes:

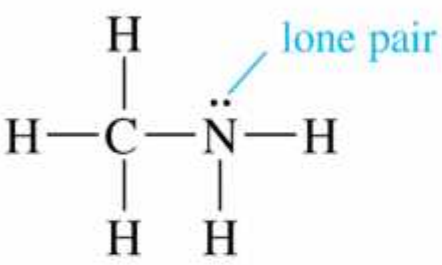


Se comprueba que las estructuras a) y d) son igual de buenas en cuanto a las cargas formales, sin embargo, habrá que convenir que la más importante (contribuye más al híbrido de resonancia) es la d) porque en ella la carga negativa está situada sobre el átomo de oxígeno, elemento más electronegativo que el nitrógeno.

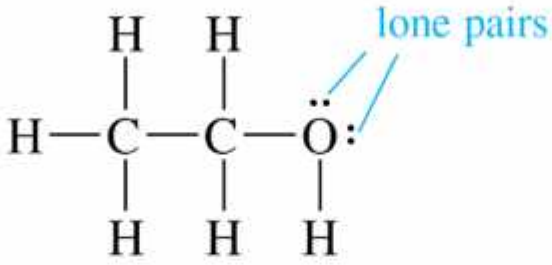
Estructuras de Lewis de enlaces simples



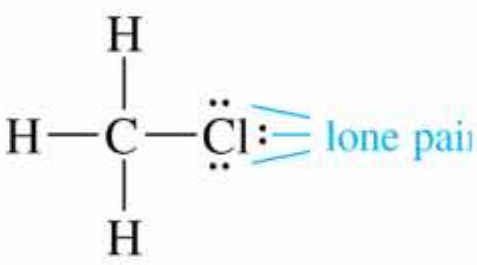
Metano



Metilamina

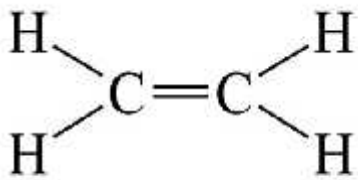


Etanol

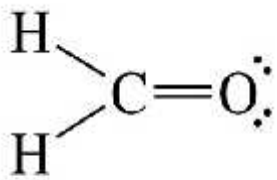


Clorometano

Ejemplos de estructuras de Lewis de enlaces múltiples

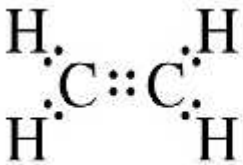


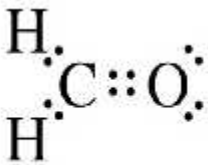
ethylene

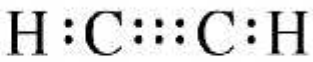


formaldehyde

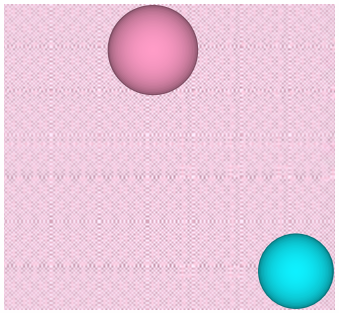
acetylene

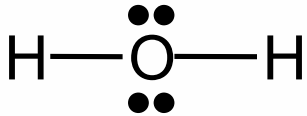






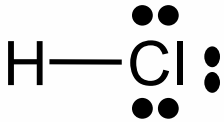
https://www.youtube.com/watch?v=F5Tpg18278U





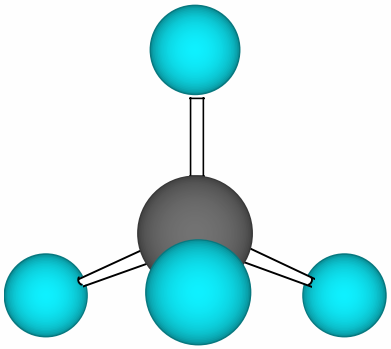
H_2O (8)

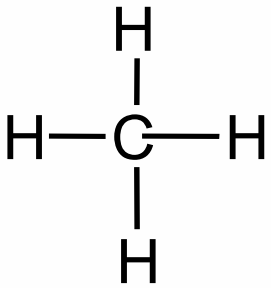
Agua



HCl (8)

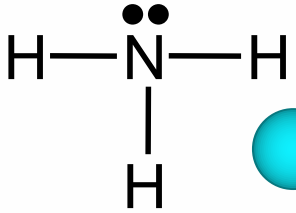
Cloruro de Hidrógeno

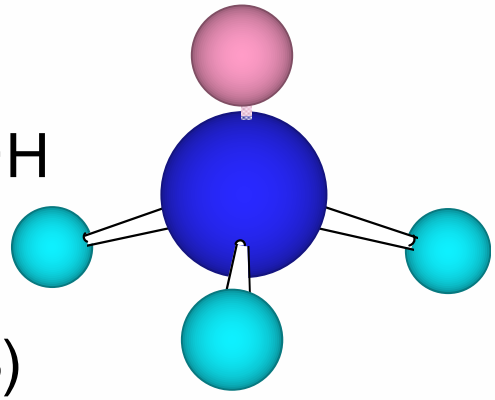




CH_4 (8)

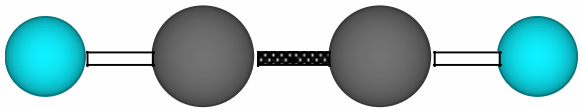
Metano





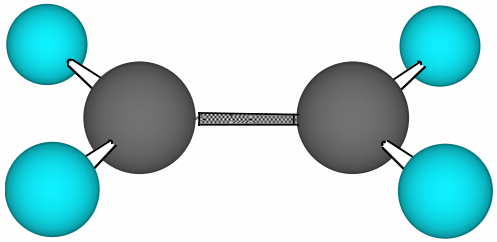
NH_3 (8)

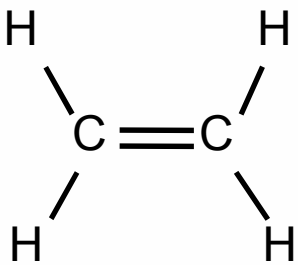
Amoniaco



C_2H_2 (10)

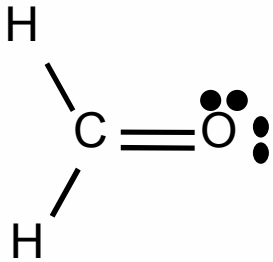
Acetileno





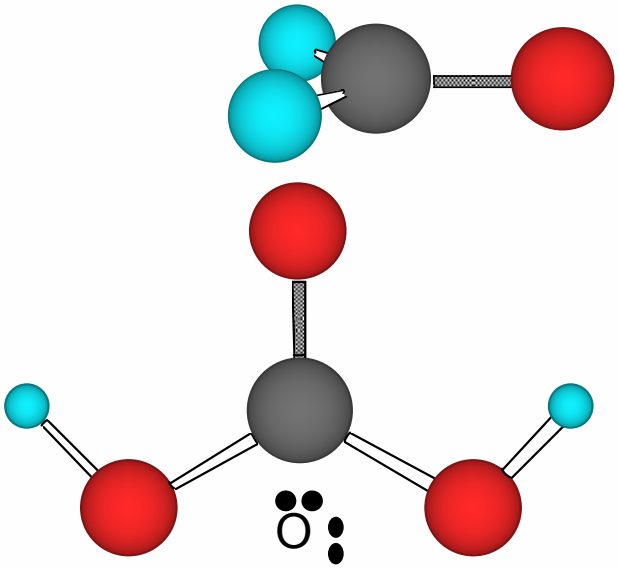
C_2H_4 (12)

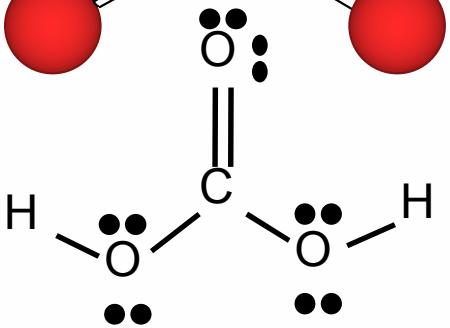
Etileno



CH_2O (12)

Metanal





H_2CO_3 (24)

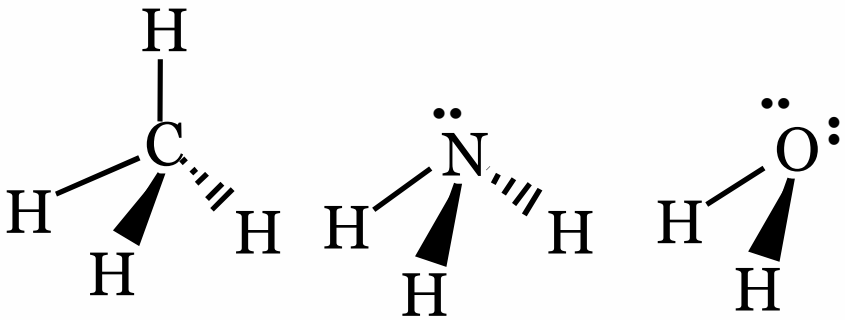
Ácido carbónico

Tipos de enlace

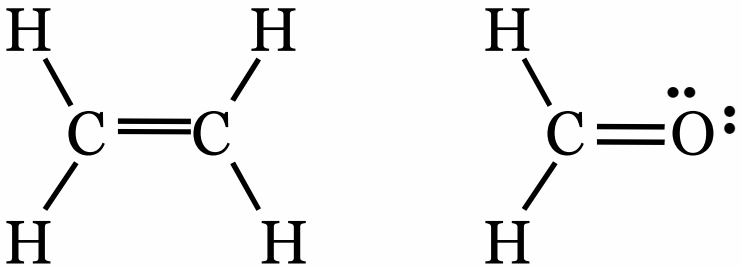
- **<u>Enlace simple:</u>** los cuatro pares de electrones se comparten con cuatro átomos distintos.
  Ejemplo: CH_4, $CH_3–CH_3$
- **<u>Enlace doble:</u>** hay dos pares electrónicos compartidos con el mismo átomo.
  Ejemplo: $H_2C=CH_2$, $H_2C=O$
- **<u>Enlace triple:</u>** hay tres pares electrónicos compartidos con el mismo átomo.
  Ejemplo: $HC\equiv CH$, $CH_3 – C\equiv N$

Modelos moleculares

Estructura
(tetraédrica, 109.5°)



Estructura
(trigonal plana, 120°)

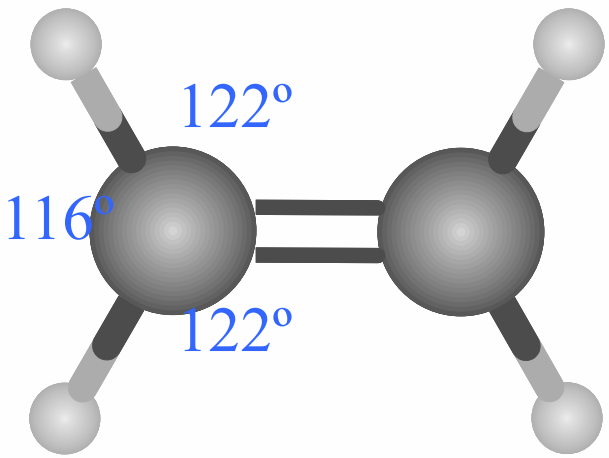


Estructura
(lineal, 180°)

El átomo central tiene un enlace doble

La repulsión debida a 2 pares electrónicos compartidos es mayor que la de uno.

$CH_2=CH_2$: cada C tiene 2 pares de e^- compartidos con el otro C y 2 pares de e^- compartidos con sendos átomos de H.



Angulo de enlace H–C=C: 122º > 120º (triangular)

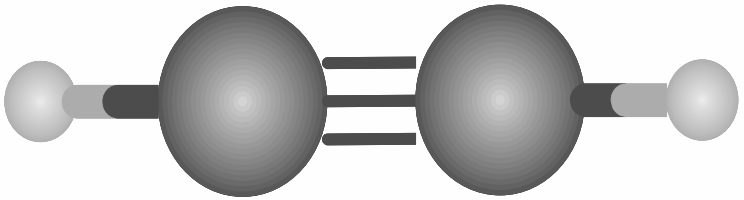
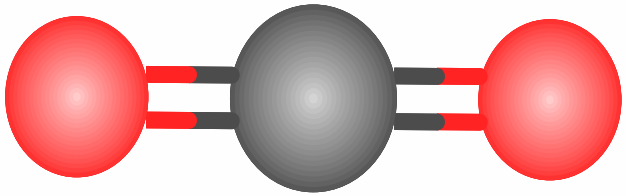
Angulo de enlace H–C–H: 116º < 120º (triangular)

El átomo central tiene dos dobles enlaces o uno sencillo y uno triple

- Como se une únicamente a dos elementos la geometría es lineal.

Ejemplos

- Etino (acetileno)



- CO_2